

東北大学金属材料研究所

計算材料学センターだより

Center for Computational Materials Science News

CCMS-NEWS

2001年12月21日(金)発行

21th Dec. (Fri) 2001

第 2 号

TEL:022-215-2411 FAX:022-215-2166

E-mail:ccms-adm@imr.edu

<http://www-lab.imr.edu/~ccms/>

年末年始のスーパーコンピューティングシステム運用について

年末年始のスーパーコンピューティングシステムの運用は、下記のように行ないます。万が一障害が発生した場合は、その時点でサービスを停止いたします。利用者の皆様のご理解を宜しくお願い致します。

記

1. 年末年始運用期間

平成13年12月28日(金)9時から
平成14年1月4日(金)10時まで

2. 年末年始の運用方法

この期間も、スーパーコンピューティングシステムは停止せずサービスいたしますので、ジョブの投入や結果のチェック等は通常通りに可能です。但し、職員による保守サービスは行ないませんので、ジョブ投入などにトラブルがあった場合に、職員の即時的対応は出来ないことをご了承願います。なお、システムが緊急停止した場合などは、その時点でサービスを停止し、1月4日から再開する予定ですので、併せてご了解下さい。

材料設計支援ソフトウェア Materials Studio のサービス開始

平成 14 年 1 月より、材料設計支援ソフトウェア Materials Studio(以下 MS) を使用していただくことができるようになりますので、お知らせします。

MS は、現在、スーパーコンピューティングシステムでサービスしています分子設計ソフトウェア Cerius2 の後継システム(Windows 版)です。MS は、グラフィカルインターフェース(以下 MS Visualizer)を中心に、オプションモジュールを組み合わせることによって、分子や結晶など多彩な物質のモデリングに最適な環境を提供するソフトウェアです。計算材料学センターでは、フローティングライセンス契約をしていますので、そのライセンス数に達するまで、登録した本所研究者は、どこからでもお使いいただけます。MS Visualizer は、PC 上で分子・結晶・合成高分子のモデルを簡単に座標に作成することができますので、アプリケーションサーバ B(cmsappb)の Cerius2 をお使いになるより、使い勝手がよいと思います。

センターでは、MS Visualizer のライセンスを新たに5つ購入しましたので、今までより多くの方にご利用いただけるようになります。なお、cmsappb でも従来どおり Cerius2 を使用することは可能ですが、今後 Cerius2 を順次 MS へ移行する予定です。

ご自分の PC 上で MS Visualizer をご利用されたい方は、インストール CD をお貸しします。ccms-adm@imr.eduまでお申し出ください。

また、1 月末日に、MS, Cerius2 の講習会を予定していますので、後日、広報させていただきます。

参照 URL: <http://www.accelrys.com/mstudio/>